

HERRAMIENTA DE ANÁLISIS Y DISEÑO PARA CELDAS DE ABSORCIÓN DE GASES CON SUPERFICIES ARBITRARIAS

Olga M. Conde, Pedro M. Cortés, Adolfo Cobo, José Miguel López-Higuera

Grupo de Ingeniería Fotónica – Dpto. TEISA – Universidad de Cantabria

Tlfn. 942-201539. 16 Fax: 942-200877

e-mail: olga.conde@unican.es

ABSTRACT

A software tool for the optimisation of the design of optical resonators for long-path absorption spectroscopy has been developed. New modelling techniques for the mirrors have been applied allowing a high degree of flexibility in the design.

1. INTRODUCCIÓN

Al emplear la técnica de espectroscopia de absorción en la detección de gases con concentraciones pequeñas o coeficientes de absorción bajos, se necesita un gran camino de interacción entre el haz de luz y el gas a detectar. Las celdas de gases multipaso típicas consisten en un volumen cerrado limitado en sus extremos por dos espejos donde el haz de luz se refleja sucesivamente quedando confinado dentro de la estructura donde el gas ha sido introducido previamente. Trabajos iniciales en lo que también se conocen como “resonadores ópticos”, de los que se ha derivado la mayoría de las celdas existentes en el mercado actualmente, son atribuibles a White [1] y Herriot [2] cuyos espejos son superficies canónicas esféricas o parabólicas. Sin embargo, una mejor relación entre el camino óptico recorrido por el haz de luz y el tamaño físico de la celda puede ser alcanzado empleando espejos astigmáticos con diferentes radios de curvatura e incluso, diferentes tipos de superficies para modelar los mismos. El trabajo presentado consiste en una herramienta software capaz de realizar el trazado de rayos existente en una celda multipaso cuando los espejos no tienen superficies canónicas sino que pueden ser totalmente arbitrarias. Esta herramienta ayudará en el diseño de las celdas, en su optimización de cara a maximizar el camino óptico recorrido y en averiguar el efecto producido por los posibles desalineamientos de los espejos o por errores en su fabricación. Los resultados del trazado de rayos han sido contrastados, a nivel del diagrama de puntos de reflexión, con trabajos teóricos y prácticos encontrados en literatura.

2. TÉCNICAS DE REPRESENTACIÓN Y ANÁLISIS

Para modelar los espejos que van a generar las múltiples reflexiones se utilizarán superficies paramétricas de grado arbitrario denominadas NURBS (*Non-Uniform Rational B-Spline*)

[3] que son utilizadas normalmente en entornos de diseño geométrico y son una unidad estándar de representación en lenguaje IGES que se emplea en maquinaria de CAD/CAM. Se ha elegido esta representación por ser altamente versátil y flexible, permitiendo el modelado de cualquier tipo de superficie y posibilitando el cálculo, mediante geometría diferencial, de los diferentes parámetros geométricos que interesan para realizar el trazado de rayos tales como vectores normales y tangentes a un punto. Un ejemplo de cómo la herramienta desarrollada visualiza las superficies de los espejos es el que se muestra en la Figura 1.

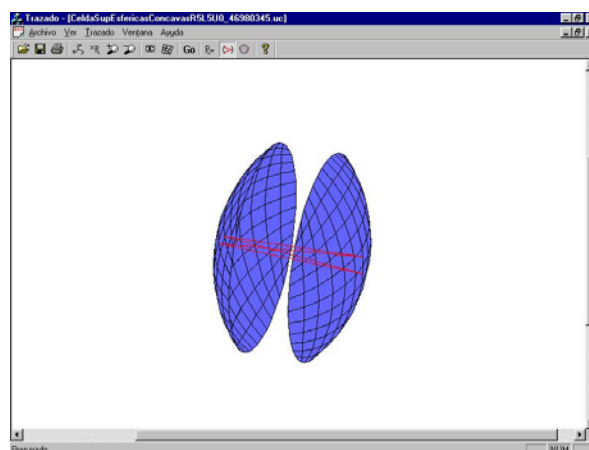


Figura 1. Representación de los espejos de la celda multipaso.

Para realizar el análisis de la celda multipaso, dos son los elementos adicionales que se deben definir:

- Modelado de la fuente de luz.
- Mecanismos del trazado de rayos.

Por ahora, la fuente es considerada desde un punto de vista geométrico. Los elementos que la caracterizan son su posición en el espejo de entrada a la celda, la divergencia del haz de luz o la apertura numérica de la fibra óptica en caso de utilizarla para acceder con ella a la celda de gases, la dirección de entrada del haz incidente y el número de rayos en que se debe descomponer el haz de entrada.

Se han desarrollado dos métodos de trazado de rayos implementados directamente sobre la naturaleza paramétrica de las superficies de los espejos:

- El primero basado en el *Principio de Fermat* que ha sido generalizado para un número de “N” reflexiones en el interior de la celda. Cada punto de reflexión “i” viene representado por su localización en coordenadas paramétricas $\vec{r}_i = \vec{r}(u_i, v_i)$. Existen además dos puntos fijos:

$\vec{r}_0 = \vec{r}(u_0, v_0)$ por donde se introduce el haz de luz y $\vec{r}_{N+1} = \vec{r}(u_{N+1}, v_{N+1})$ por donde se extrae la luz de la celda. Entre ambos puntos extremos se pueden formular “N+1” tramos cuya distancia final “d” se puede optimizar ya que depende de las coordenadas paramétricas (u_i, v_i) de cada punto de reflexión individual:

$$d(u_0, v_0, u_1, v_1, \dots, u_N, v_N, u_{N+1}, v_{N+1}) = \sum_{i=0}^N d_i(u_i, v_i, u_{i+1}, v_{i+1}) = \sum_{i=0}^N \|\vec{r}(u_{i+1}, v_{i+1}) - \vec{r}(u_i, v_i)\| = \sum_{i=0}^N \|\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i\| \quad (1)$$

donde $\|\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_i\|$ es la distancia Euclídea entre los puntos \vec{r}_i y \vec{r}_{i+1} . Para optimizar esta función maximizándola, se debe anular el gradiente de la misma respecto a las coordenadas paramétricas de los puntos de reflexión $(u_1, v_1, u_2, v_2, \dots, u_{N-1}, v_{N-1}, u_N, v_N)$ que son a su vez las incógnitas del problema. Para esta tarea, se ha empleado el Gradiente Conjugado [4] formulando analíticamente el gradiente de la función distancia para un número genérico de reflexiones “N”. La solución ofrecida por el algoritmo de optimización numérica es posteriormente validada mediante el cumplimiento de la Ley de Snell en cada reflexión.

- “Shooting and Bouncing” [5]: este algoritmo se ha adoptado del análisis electromagnético de cavidades que también tienen formas cóncavas. El trazado de rayos se realiza secuencialmente. El proceso consiste en lanzar rayos, en cada punto de reflexión, en la dirección que cumple la Ley de Snell. Posteriormente, el próximo punto de reflexión se encontrará analizando la intersección entre la superficie paramétrica y el rayo proveniente de la reflexión anterior. Este problema de intersección rayo-superficie se resuelve de nuevo aplicando una nueva versión del Gradiente Conjugado. El proceso finaliza cuando se encuentra una solución válida para el número de reflexiones especificado por el usuario.

3. RESULTADOS

Los resultados se han validado comparándolos con celdas reportadas en literatura que presentan configuraciones canónicas: espejos esféricos [6] y espejos parabólicos [7]. Cuando, por ejemplo, en una celda con espejos parabólicos la luz entra con una pendiente específica, los puntos de reflexión forman un patrón circular. La figura 2 muestra un ejemplo de este patrón obtenido. En otros casos, forma un patrón elíptico como también se ha podido comprobar numérica y gráficamente.

Con la misma herramienta, una nueva celda multipaso con espejos pseudo-esféricos ha sido diseñada capaz de lograr una relación entre el camino óptico y la dimensión física de la celda

realmente elevada. Además, según sea la dirección inicial de incidencia de la luz, se obtienen diferentes patrones de reflexión siendo capaces de distribuir uniformemente el haz por todo el volumen de la celda de gases minimizando así la interferencia.

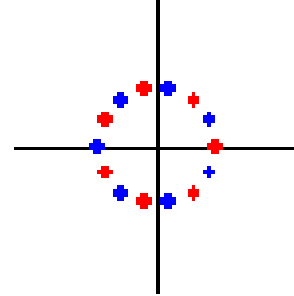


Figura 2. Patrones de reflexión, para 13 reflexiones, en celda con espejos parabólicos [7].

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado una nueva herramienta para el análisis y posterior diseño de celdas de gases en configuración multipaso. Como ventajas novedosas presenta el modelado de los espejos que conforman el resonador óptico mediante superficies paramétricas que permiten obtener formas arbitrarias que optimicen la longitud del camino de interacción luz-gas. Sobre la estructura de superficies paramétricas se han desarrollado diferentes métodos de trazado de rayos presentando el de “shooting and bouncing” un mejor comportamiento debido a la concavidad de los espejos. Los resultados obtenidos se han contrastado con los publicados para celdas simples comparando el patrón formado, en cada espejo, por los puntos de reflexión. Se sigue trabajando sobre la herramienta de cara a valorar, a priori, la sensibilidad a las tolerancias de fabricación y alineamientos.

5. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido cofinanciado por la UE a través del proyecto FEDER “SOGAM” 1FD97-2257 y por la CICYT mediante el TIC’2001-0877-C02-01.

6. REFERENCIAS

- [1] J.U.White, “Long optical paths of large aperture”, J.O.S.A., Vol.32, pp.285-288, 1942.
- [2] D.R.Herriott, J.U.White, “Long optical paths of large aperture”, J.O.S.A., Vol.32, pp.285-288, 1942.
- [3] Gerald Farin, ‘Curves and surfaces for CAGD’, Academic Press, 3rd Ed, 1993.
- [4] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, ‘Numerical Recipes’, Cambridge University Press, 1987.
- [5] H.Ling, R-C.Chou, S-W Lee, “Shooting and bouncing rays: calculating the RCS of an arbitrarily shaped cavity”, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, Vol. 37, No. 2, pp.194-205, 1989.
- [6] W.R.Trutna, R.L.Byer, “Multiple-pass Raman gain cell”, *Applied Optics*, Vol.19, No.2, pp.301-312, 15 January 1980.
- [7] J.Altmann, R.Baumgart, C.Weitkamp, “Two-mirror multipass absorption cell”, *Applied Optics*, Vol.20, No.6, pp.995-999, 15 March 1981.